

Влияние межатомных потенциалов на массоперенос сверхзвуковыми 2-краудионами

Сунагатова Ильсия Рахимовна

Башкирский государственный университет

Дмитриев Сергей Владимирович, д.ф.-м.н., Валитов Венер Анварович, д.т.н.

sunagatova66@gmail.com

Межузельный атом, помещенный в плотно упакованный атомный ряд, называется краудионом. Краудионы очень эффективны в массообмене в кристаллической решетке, поскольку они являются очень подвижными, солитоноподобными объектами. Один межузельный атом может двигаться вдоль плотно упакованного атомного ряда со сверхзвуковой скоростью в двух различных режимах, как классический 1-краудион и как 2-краудион. Разница в том, что в последнем случае два атома движутся с высокой скоростью одновременно, тогда как в первом случае только один атом имеет высокую скорость. Наиболее важной характеристикой межатомных потенциалов, которая влияет на длину пути краудиона, является энергия межатомной связи на расстоянии между двумя атомами, равном половине равновесного межатомного расстояния. Этот вывод обосновывается условием самофокусировки распространения сверхзвуковых краудионов, то есть скорость столкновения атомов не должна превышать значения, когда они приближаются друг к другу ближе, чем на половину межатомного расстояния.

В качестве примера рассмотрен перенос массы 1- и 2-краудионами в двумерной треугольной решетке с потенциалами Морзе и Борна-Майера. Считается, что двумерная треугольная решетка ускоряет моделирование и учитывает, что результаты, полученные ранее для двумерных и трехмерных решеток Морзе, находятся в очень хорошем качественном согласии и отличаются только количественно [1,2]. Итак, рассматривается треугольная двумерная решетка с межатомным расстоянием d . Как показано на рис.1, ось x направлена вдоль плотноупакованных атомных рядов.

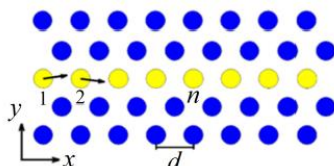


рис.1. Атомы треугольной решетки на плоскости xy . Ось x направлена вдоль плотноупакованного атомного ряда, d – межатомное расстояние или диаметр атома. Атомы в одном плотно упакованном ряду (более светлые) пронумерованы индексом n . Показаны начальные условия для инициализации 2-краудиона: атомы 1 и 2 имеют начальные скорости с компонентами $(V_0, \varepsilon V_0)$ и $(V_0, -\varepsilon V_0)$, где V_0 – начальная скорость и $\varepsilon = 10^{-6}$.

Рассмотрены два парных межатомных потенциала. Потенциал Морзе имеет вид

$$U_{MR}(r) = D (e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)}) \quad (1)$$

Здесь U_{MR} – потенциальная энергия двух взаимодействующих атомов, r – расстояние между ними, а α , D и r_m – параметры потенциала. Функция $U_{MR}(r)$ имеет минимум при $r = r_m$, D – это глубина потенциала (энергия связи), а α определяет жесткость межатомной связи. Аналогично, потенциал Леннард-Джонса определяется выражением:

$$U_{LJ}(r) = L \left[\left(\frac{r_l}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_l}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

Здесь параметры потенциала обозначены как L и r_l . Первый определяет глубину потенциала (энергию связи), а второй – равновесное межатомное расстояние. Параметры двух потенциалов были выбраны таким образом, чтобы удовлетворить следующие условия:

$$U_{MR}(r_{min}) = U_{LJ}(r_{min}) = -1, \quad (3) \quad \frac{dU_{MR}}{dr}(r_{min}) = \frac{dU_{LJ}}{dr}(r_{min}) = 0, \quad (4)$$

$$\frac{d^2U_{MR}}{dr^2}(r_{min}) = \frac{d^2U_{LJ}}{dr^2}(r_{min}), \quad (5)$$

где без ограничения общности мы устанавливаем $r_{min} = 1$.

Потенциалы Морзе и Леннард-Джонса показаны на рис.2 пунктирной и сплошной линиями соответственно. На вставке потенциалы показаны в окрестности минимума, а на основном рисунке показаны отталкивательные части потенциалов. Части потенциалов, описывающие притяжение ($r > 1$) близки друг к другу, но отталкивательные части ($r < 1$) заметно отличаются. При изучении краудионов важна отталкивающая часть потенциала, поскольку межузельный атом создает локальное сжатие.

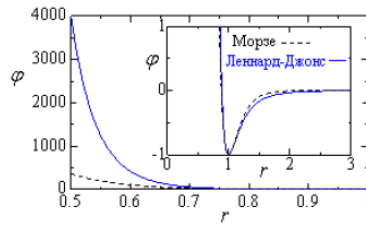


рис.2. Отталкивательная часть потенциалов Морзе и Леннард-Джонса (пунктирная и сплошная линии, соответственно).

Уравнения движения атомов интегрировались с использованием метода Штормера шестого порядка точности с шагом по времени, равным $\tau = 10^{-3}$. Тепловых колебаний не вводилось, то есть моделирование проводилось при температуре 0 К. Малая компонента вектора скорости в направлении вводилась для анализа самофокусировки краудиона. Энергия, передаваемая системе при возбуждении краудионов, равна начальной кинетической энергии возбужденных атомов,

$$E_0 = NMV_0^2/2, \quad (6)$$

где $N=1$ и 2 для 1- и 2-краудионов, соответственно. Напомним, что масса атома в наших моделях равна $M=1$. Основной результат данного исследования представлен на рис.3, длина пробега 1- и 2- краудионов, измеренная в межатомных расстояниях $N=x/a$, показана как функция начальной скорости V_0 , возбужденных атомов для (а) потенциала Морзе и (б) потенциала Леннард-Джонса.

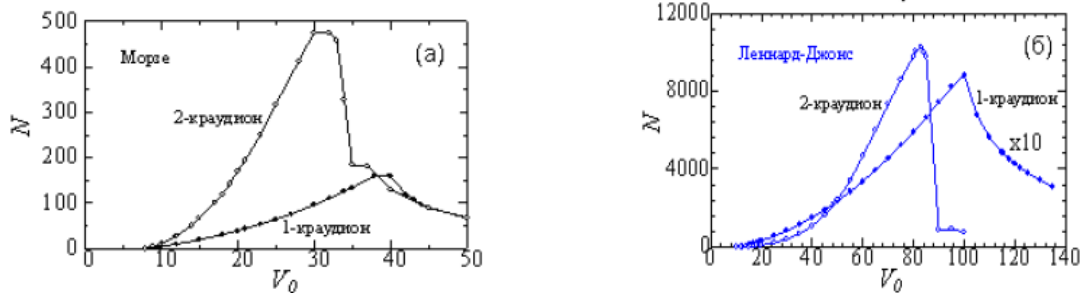


рис.3. Длина пути краудиона в межатомных расстояниях как функция начальной скорости возбужденных атомов (V_0 (а) и начальной энергии возбужденных атомов E_0 (б)). Открытые и заполненные кружки предназначены для 1- и 2-краудионов, соответственно, движущихся в кристалле Морзе. Открытые и заполненные квадраты предназначены для 1- и 2-краудионов, движущихся соответственно в кристалле Леннард-Джонса. Отметим, что на нижней панели данные для 1-краудиона в кристалле Леннард-Джонса умножены на 10.

Хорошо видно, что в обоих кристаллах 2-краудионы имеют в существенно большую длину пробега, чем 1-краудионы. В решетке Леннард-Джонса условие самофокусировки выполняется для столкновений с более высокой энергией. Имея более высокие начальные энергии, самофокусирующиеся краудионы в решетке Леннард-Джонса преодолевают большие расстояния. Таким образом, в данной работе установлено влияние отталкивательной части межатомного потенциала на динамику сверхзвуковых 1- и 2-краудионов. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 18-19-00685.

Список публикаций:

- [1] E. A. Korznikova, I. A. Shepelev, A. P. Chetverikov, S. V. Dmitriev, S. Y. Fomin, K. Zhou. *J. Exp. Theor. Phys.* 127, 1009 (2018).
- [2] И.П. Сунагатова, А.С. Семенов, А.М. Баязитов, Е.А. Корзникова, *Фундаментальные проблемы современного материаловедения* 16(4), 482-488 (2019).
- [3] E.A. Korznikova, I.R. Sunagatova, A.M. Bayazitov, A.S. Semenov, S.V. Dmitriev, *Letters on Materials* 9(4), 386-390 (2019).
- [4] A. M. Iskandarov, N. N. Medvedev, P. V. Zakharov, S. V. Dmitriev. *Comput. Mater. Sci.* 47, 429 (2009).
- [5] A. P. Chetverikov, I. A. Shepelev, E. A. Korznikova, A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev, M. G. Velarde. *Computational Condensed Matter*. 13, 59 (2017).